

TD DE CHIMIE GENERALE
ATOMISTIQUE
SERIE N° 3

Exercice I

Etablir l'expression de l'équation de schrodinger pour les systèmes suivants :

- a) L'atome d'hydrogène.
- b) L'ion ${}^3\text{Li}^+$, ${}^4\text{He}^+$, ${}^9\text{Be}^{2+}$

Exercice II

Quelles sont les valeurs des nombres quantiques n , l et m caractéristiques des orbitales atomiques : $1s$, $2p$, $3p$, $3d$, $4d$ et $4f$.

Exercice III

Classer par ordre croissant de leurs énergies les électrons d'un même atome définis par les valeurs suivantes de leurs nombres quantiques. Identifier les sous couches auxquelles ils appartiennent.

- 1) $n = 2$; $l = 1$; $m = 0$; $s = +1/2$.
- 2) $n = 3$; $l = 0$; $m = 0$; $s = -1/2$.
- 3) $n = 2$; $l = 1$; $m = 0$; $s = -1/2$.
- 4) $n = 2$; $l = 0$; $m = 0$; $s = +1/2$.
- 5) $n = 2$; $l = 1$; $m = -1$; $s = +1/2$.

Exercice IV

- a) Donner les valeurs des quatre nombres quantiques caractérisant chacun des électrons de l'oxygène ($Z=8$) dans son état fondamental.
- b) Ecrire à l'aide des cases quantiques, la configuration électronique du carbone ($Z=6$), du Fluor ($Z=9$) et de l'Aluminium ($Z=13$) à l'état fondamental.

Exercice V

Donner la configuration électronique des éléments suivants :

Element :	Mg	S^{2-}	Ca^{2+}	Cr	Cu	Zn^{2+}	Br	Cd
Z :	12	16	20	24	29	30	35	48

Exercice VI

Un élément X possède moins de 18 électrons. Quelles sont les configurations électroniques possibles correspondant à X dans les cas suivants:

- a) X possède deux électrons célibataires.
- b) X possède trois électrons célibataires.
- c) X ne possède aucun électron célibataire.

Exercice VII

Donner la configuration électronique des éléments X, Y et W telle que :

- a) X possède deux électrons de plus que le Titane ($Z=22$).
- b) Y possède trois électrons célibataires sur la couche L.
- c) W possède quatre protons de moins que l'Arsenic ($Z=33$).

Exercice VIII

Calculer le numéro atomique apparent Z_i pour :

- a) Chaque électron de l'atome du Fluor ($Z=9$).
 b) L'électron le plus externe des éléments Mg ($Z=12$), P ($Z=15$) et V ($Z=23$).

Exercice IX

Le Cobalt ($Z=27$) peut donner l'ion Co^{2+} en perdant deux électrons. En utilisant les règles de Slater, déterminer l'énergie d'ionisation du Cobalt en ion Co^{2+} .

Exercice X

Calculer l'énergie totale de l'atome du Calcium ($Z=20$).

Données : les valeurs des coefficients d'écran et celles de n^* .

	1s	2s2p	3s3p	3d	4s4p	4d	4f	5s5p
								p
1s	0,31							
2s2p	0,85	0,35						
3s3p	1	0,85	0,35					
3d	1	1	1	0,35				
4s4p	1	1	0,85	0,85	0,35			
4d	1	1	1	1	1	0,35		
4f	1	1	1	1	1	1	0,35	
5s5p	1	1	1	1	0,85	0,85	0,85	0,35
n	1	2	3	4	5			
n^*	1	2	3	3,7	4			

TD Serie 3 Atomistique

Exercice 1:

Le principe fondamental de la mécanique quantique est

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad \text{eq de Schrödinger}$$

ψ : fct d'onde d'un atome d' e^-

\hat{H} : l'opérateur hamiltonien

E : l'énergie totale

Mécanique classique

$$E_c = \frac{1}{2} m v^2$$

$$E_p = V = \frac{q q'}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$H = \hat{T} + \hat{V}$$

Mécanique quantique

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

$$V = \frac{q q'}{4\pi\epsilon_0 r}$$

a) l'atome d'Hydrogène:

\Rightarrow 1 noyau de charge $+e$ et un e^- de charge $(-e)$

$$\left\{ \begin{aligned} \hat{T} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \\ \hat{V} &= \frac{+e \cdot e^-}{4\pi\epsilon_0 r} \end{aligned} \right.$$

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi = E\psi$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = E\psi$$

b) l'ion ${}^3\text{Li}^+$

noyau de charge $3e^+$ et $2e^-$

on aura les interactions suivantes:



$3e^+ \rightarrow e^-$ (attraction)

$3e^+ \rightarrow e^-$ (")

$e^- \rightarrow e^-$ (repulsion)

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

$$\hat{V} = -\frac{3e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} - \frac{3e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1}$$

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \rightarrow H\psi = E\psi$$

Donc

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{3e^2}{r_2} + \frac{3e^2}{r_2} - \frac{e^2}{r_{12}} \right) \psi = E\psi$$

+ ^1He , l'équation de S

$$H\psi = E\psi$$

$$\text{car } \hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

$$\hat{V} = -\frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi - \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 r} \psi = E\psi$$

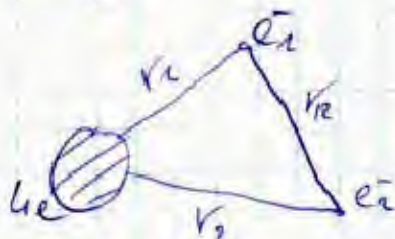
+ $^4\text{Be}^{2+}$ l'équation de Schrodinger

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

$$\hat{V} = -\frac{4e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} - \frac{4e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1}$$



$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{\pi\epsilon_0 r_2} - \frac{e^2}{\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right) \psi = E\psi$$

Exercice 2:

* n : nombre quantique principal $n \in \mathbb{N}^*$

n définit la couche

n	1	2	3	4	5	6
couche	K	L	M	N	O	P

* l : nombre quantique secondaire

$$0 \leq l \leq n-1$$

l définit la sous couche ou O.A

l	0	1	2	3
O.A	s	p	d	f

* m : nbre quantique magnétique:

$$l \leq m \leq -l$$

le nbre de valeurs que prend m représente le nbre d'O.A

$$l=0; m=0 \Rightarrow 1 \text{ O.A. } s$$

$$l=1; m=-1, 0, 1 \Rightarrow 3 \text{ O.A. } p$$

$$l=2; m=-2, -1, 0, 1, 2 \Rightarrow 5 \text{ O.A. } d$$

$$l=3; m=-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3 \Rightarrow 7 \text{ O.A. } f$$

O.A	n	l	m
1s	1	0	0
2p	2	1	-1, 0, 1
3p	3	1	-1, 0, 1
3d	3	2	-2, -1, 0, 1, 2
4d	4	2	-2, -1, 0, 1, 2
4f	4	3	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3

Exercice 3

Electron	n	l	m	s
1	2	1(2p)	0	1/2
2	3	0(3s)	0	-1/2
3	2	1(2p)	0	-1/2
4	2	0(2s)	0	1/2
5	2	1(2p)	-1	1/2



2s



2p



3s

On sait que l'ordre des énergies de OA est.

$$2s < 2p < 3s$$

$$E_4 < E_2 = E_3 = E_5 < E_1$$

L'ordre de l'OA respecte la n énergie.

Exercice 4

Conf. élec = répartition des e^- sur \neq OA

- Principe de Pauli: 2 e^- ne peuvent avoir les 4 nombres quantiques identiques
- Règle de Hund
- Règles de stabilité (Klechkowsky)



$$Q(Z=27) : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5 \quad K^2 L^8 M^7$$

n couche $2n$ OA

$2n e^-$

$$n=1 \rightarrow 1 \text{ OA} \Rightarrow 1s (2e^-)$$

$$n=2 \rightarrow 2 \text{ OA} \Rightarrow (2s^2 2p) (8e^-)$$

$$n=3 \rightarrow 3 \text{ OA} \Rightarrow (3s^2 3p 3d) (18e^-)$$

$$a) O (Z=8) \Rightarrow E.F. \Rightarrow 8e^-$$

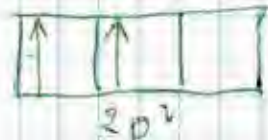
conf. élect: $1s^2 2s^2 2p^4$

cases quantiques



e^-	n	l	m	Δ
1	1	0	0	$1/1$
2	1	0	0	$-1/2$
3	2	0	0	$1/2$
4	1	0	0	$-1/2$
5	2	1	-1	$1/2$
6	2	1	+1	$-1/2$
7	2	1	0	$1/2$
8	2	1	1	$1/2$

$$b) C (Z=6) \Rightarrow 1s^2 2s^2 2p^2$$



$$F (Z=9) \Rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5$$



Al (Z=13) $\Rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$



1s



2s



2p



3s



3p

Exercice 5

a) conf élec de Mg (Z=12): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$

" " " S^{2+} (Z=16): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ (18e-)

" " " Ca^{2+} (Z=20, 18e-): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

" " " Cu (Z=29, 28e-): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^9$

\Downarrow
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^9$

$$n s^2 (n-1) d^4 \Rightarrow n s^2 (n-1) d^5$$

$$n s^2 (n-1) d^9 \Rightarrow n s^2 (n-1) d^{10}$$

conf élec de Cu (Z=29, 29e-): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^9$

\Downarrow
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^{10}$

" " " Zn^{2+} (Z=30, 28e-): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10}$

" " " Br^- (Z=35, 36e-): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$

" " " Cd (Z=48, 48e-): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10}$

Fe (Z=26): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$

Fe^{2+} (24e-): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6$

Fe^{3+} (23e-): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5$

\Rightarrow Cd: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6$

Exercice 6

a) Écrire X dont $Z(X) < 18$

$Z < 18$ donc les OA ne sont pas concernés, puisque'il se remplissent qu'à partir de $Z = 18$

b) X possède $3e^-$ célibataires

$3e^-$ célibataires ne peuvent être que sur OA p. Donc la répartition sera np^3 avec $n = 2$ et 3

Donc les confs possibles sont:

$$1s^2 2s^2 2p^3 \quad Z = 7$$

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3 \quad Z = 25$$

a) X possède $2e^-$ célibataires

$2e^-$ célibataires ne peuvent être que sur l'OA p. Donc les répartition possibles sont np^2 et np^4 avec $n = 2$ et 3

Donc les confs élect possibles sont:

$$1s^2 2s^2 2p^2 \quad Z = 6$$

$$1s^2 2s^2 2p^6 \quad Z = 8$$

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2 \quad Z = 16$$

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4 \quad Z = 18$$



La case élect



e^- célibataire



$2e^-$ appariés

c) X ne possède aucun e^- célibataire
 on a des O.A saturés, donc des répartitions ns^2 et np^6
 avec $n = 1, 2$ et 3

$$1s^2 \quad Z=2$$

$$1s^2 2s^2 \quad Z=4$$

$$1s^2 2s^2 2p^6 \quad Z=10$$

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 \quad Z=12$$

~~1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6~~

Exercice 7

a) X possède $2e^-$ de plus que le Titane

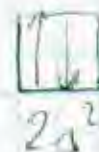
$$Z(Ti) = 22 \Rightarrow Z(X) = 24 \quad Z(X) = 24$$

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$$

b) Y possède $3e^-$ célibataires sur L

la couche L $\rightarrow n=2 \rightarrow$ O.A $2s$ et $2p$

$$1s^2 2s^2 2p^3 \quad Z=7$$



c) W possède $9e^-$ de moins que l'Argent

$$Z(Ag) = 47 \Rightarrow Z(W) = 38$$

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$$

Exercice 8:

a) F, $Z=9$

$$E_n = -13,6 \frac{Z^2}{n^2} \quad (\text{Het les hydrides})$$

\Downarrow

$$E_n = -13,6 \frac{Z^{*2}}{n^{*2}} \quad (\text{Les atomes polyelectroniques})$$

$$Z_i^* = Z - \sum_j \sigma_j$$

$j > i$

$$\sigma_j = 0$$

$j = i$

$$\sigma_j = 0,35$$

sauf si $j=i=1$

$$\sigma_j = 0,31$$

$j < i$

$$\sigma_j = 1$$

sauf si i est s ou p et $\Delta n = 1$

$$\sigma_j = 0,85$$

F, C.E.: $1s^2 2s^2 2p^5$

Con de Slater: $(1s^2)(2s^2 2p^5)$

le d'un même groupe possède le m^{ême} Z^* de la m^{ême} énergie E_i :

$$Z_{(1s)}^* = 9 - (1 \times 0,31) = 8,69$$

$$Z_{(2s, 2p)}^* = 9 - (2 \times 0,85 + 6 \times 0,35) = 5,2$$

b) Mg ($Z=12$)

C.E.: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$

Con de Slater: $(1s^2)(2s^2 2p^6)(3s^2)$

$$Z_{(3s)}^* = 12 - (2 \times 1 + 8 \times 0,85 + 1 \times 0,35) = 2,85$$

→ P ($Z=15$)

C.E.: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$

Con de Slater: $(1s^2)(2s^2 2p^6)(3s^2 3p^3)$

$$Z_{(3s, 3p)}^* = 15 - (2 \times 2 + 8 \times 0,85 + 4 \times 0,35) = 4,8$$

$$V (Z=13)$$

$$C.E.: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^3$$

$$\text{Co de Slater: } (1s^2)(2s^2 2p^6)(3s^2 3p^6)(3d^3)(4s^2)$$

$$Z_{(4s)}^* = 13 - (2 \times 1 + 8 \times 1 + 8 \times 0,85 + 3 \times 0,85 + 2 \times 0,35) = 3,3$$

Exercise 9:

$$Co \quad Z=27$$



$$E_i = E(Co^{2+}) - E(Co)$$

$$C.E.: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^7 \quad (Co)$$

$$C.E.: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7 \quad (Co^{2+})$$

Co de Slater:

$$Co: (1s^2)(2s^2 2p^6)(3s^2 3p^6)(3d^7)(4s^2)$$

$$Co^{2+}: (1s^2)(2s^2 2p^6)(3s^2 3p^6)(3d^7)$$

$$E_i = 2E_{(4s)} + 8E_{(3s^2 3p^6)} + 8E_{(3s^2 3p^6)} + 7E_{(3d^7)} - \\ - 2E_{(1s^2)} - 8E_{(2s^2 2p^6)} - 8E_{(3s^2 3p^6)} - 7E_{(3d^7)} - 2E_{(4s^2)}$$

$$E_i = -2E_{(4s^2)}$$

$$E_n = -13,6 \frac{Z_{n,l}^{*2}}{n^2} (eV)$$

$$Z_{(4s)}^* = \cancel{27 - (2 \times 1 + 8 \times 1 + 8 \times 0,85 + 7 \times 0,85 + 2 \times 0,35)} \\ = 27 - (2 \times 1 + 8 \times 1 + 8 \times 0,85 + 7 \times 0,85 + 2 \times 0,35) = 3,9$$

$$n=4 \rightarrow n^* = 3,7$$

$$E_{(4s^2)} = -13,6 \times \frac{(3,9)^2}{(3,7)^2} = -15,11 eV$$

$$\text{Donc: } E_i = 30,22 eV$$

Exercice 10

Ca: $Z=20$

C.E: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$

Code Slater: $(1s^2)(2s^2 2p^6)(3s^2 3p^6)(4s^2)$

$$E_T(\text{Ca}) = 2E(1s) + 8E(2s^2 2p^6) + 8E(3s^2 3p^6) + 2E(4s)$$

$$\begin{cases} Z^*(1s) = 20 - (1 \times 0,32) = 19,69 \\ Z^*(2s^2 2p^6) = 20 - (2 \times 1 + 7 \times 0,35) = 15,85 \\ Z^*(3s^2 3p^6) = 20 - (2 \times 1 + 8 \times 0,85 + 7 \times 0,35) = 8,75 \\ Z^*(4s) = 20 - (2 \times 1 + 8 \times 0,85 + 8 \times 0,35 + 1 \times 0,35) = 2,85 \\ E(1s) = -13,6 \times \frac{Z^{*2}(1s)}{(1)^2} = -5278,67 \text{ eV} \\ E(2s^2 2p^6) = -13,6 \times \frac{Z^{*2}(2s^2 2p^6)}{(2)^2} = -894,19 \text{ eV} \\ E(3s^2 3p^6) = -13,6 \times \frac{Z^{*2}(3s^2 3p^6)}{(3)^2} = -125,69 \text{ eV} \\ E(4s) = -13,6 \times \frac{Z^{*2}(4s)}{(4)^2} = -8,07 \text{ eV} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} E_T(\text{Ca}) &= -2 \times 5278,67 - 8 \times 894,19 - 8 \times 125,69 - 2 \times 8,07 \\ &= -18390 \text{ eV} \end{aligned}$$

$$E_T(\text{Ca}) = -18,32 \text{ KeV}$$



ETUSUP.com

Programmmation
Cours
Electricité
Physique
Résumés
Analyse
Livres
Exercices
Contrôles Continus
Langues
Thermodynamique
Multimedia
Divers
Economie
Travaux Dirigés
Chimie Organique
Informatique
Optique
Chimie
Diapo
Algèbre
Corrigés
Mathématiques
Mécanique
Travaux Pratiques
Droit

et encore plus..

